Поэтому из (13) получим

$$e^{ikr\mu} = 2^{\nu}\Gamma(\nu)\sum_{n=0}^{\infty} i^n(\nu+n)\frac{J_{\nu+n}(kr)}{(kr)^{\nu}}C_n^{\nu}(\mu).$$

При $\nu = 1/2$ отсюда легко вывести *разложение плоской волны* $e^{i\mathbf{kr}}$ по полиномам Лежандра:

$$e^{i\mathbf{kr}} = \sqrt{\frac{2\pi}{kr}}\sum_{n=0}^{\infty} i^n\left(n+\frac{1}{2}\right)J_{n+1/2}(kr)\,P_n(\mu), \tag{14}$$

где $\mathbf{k}$ — волновой вектор, $\mu = \cos\theta$, θ — угол между векторами $\mathbf{k}$ и $\mathbf{r}$.

§ 19. Квазиклассическое приближение

При рассмотрении соответствия между классической физикой, оформившейся к концу XIX в., и появившейся в начале XX в. квантовой механикой возникла задача о получении равномерной асимптотики при $\lambda \to +\infty$ решений дифференциального уравнения вида

$$[k(x)y']' + \lambda r(x)y = 0.$$

Полученное при таком исследовании приближенное представление решений уравнения в квантовой механике называют *квазиклассическим приближением.* Квазиклассическое приближение оказалось удобным при рассмотрении многих вопросов математической физики.

1. Квазиклассическое приближение для решений уравнений второго порядка. Выясним поведение решений уравнения

$$[k(x)y']' + \lambda r(x)y = 0 \tag{1}$$

при $\lambda \to +\infty$. Поведение решений этого уравнения существенно зависит от знака функций $k(x)$ и $r(x)$, в чем легко убедиться, полагая, например, $k(x) = \text{const}$, $r(x) = \text{const}$. Поэтому в дальнейшем мы будем рассматривать уравнение (1) в области, где функции $k(x)$, $r(x)$ знакопостоянны. Рассмотрим сначала случай, когда на некотором интервале (a, b) функции $k(x)$, $r(x)$ имеют одинаковые знаки, например $k(x) > 0$, $r(x) > 0$, и пусть эти функции имеют непрерывные производные первого и второго порядка.

1°. Приведем уравнение (1) с помощью замены переменных

$$y(x) = \varphi(x)u(s), \qquad s = s(x), \tag{2}$$

к более удобному для исследования виду. После этой замены уравнение (1) примет вид

$$u'' + f(s)u' + [\lambda g(s) - q(s)]u = 0, \tag{1a}$$

где

$$f(s)=\frac{2k(x)\,s'(x)\varphi'(x)+[k(x)\,s'(x)]'\varphi(x)}{k(x)\,\varphi(x)\,[s'(x)]^2},$$

$$g(s)=\frac{r(x)}{k(x)\,[s'(x)]^2},\quad q(s)=-\frac{[k(x)\,\varphi'(x)]'}{k(x)\,\varphi(x)\,[s'(x)]^2}.$$

Для исследования поведения решений уравнения (1а) при больших значениях λ удобно выбрать функции $s(x)$, $\varphi(x)$ из условий $g(s)=1$, $f(s)=0$, т. е. из условий

$$[s'(x)]^2=\frac{r(x)}{k(x)},$$

$$\frac{\varphi'(x)}{\varphi(x)}=-\frac{1}{2}\frac{[k(x)\,s'(x)]'}{k(x)\,s'(x)}=-\frac{1}{4}\frac{[k(x)\,r(x)]'}{k(x)\,r(x)}. \tag{3}$$

В результате приходим к уравнению

$$u''+[\lambda-q(s)]u=0, \tag{4}$$

где

$$q(s)=-\frac{[k(x)\,\varphi'(x)]'}{r(x)\,\varphi(x)}.$$

Если использовать уравнение (3) для $\varphi(x)$, то выражение для $q(s)$ можно переписать в виде

$$q(s)=\frac{k}{4r}\left[\left(\frac{k'}{k}+\frac{r'}{r}\right)'+\left(\frac{3}{4}\frac{k'}{k}-\frac{1}{4}\frac{r'}{r}\right)\left(\frac{k'}{k}+\frac{r'}{r}\right)\right]. \tag{5}$$

В случае, когда функции $k(x)$, $r(x)$ имеют разные знаки на (a, b), уравнение (1) заменой (2) приводится к виду, аналогичному (4):

$$u''(s)-[\lambda+q(s)]u(s)=0. \tag{6}$$

Так как изучение поведения решений при $\lambda\to+\infty$ для уравнения (6) проводится теми же методами, что и для уравнения (4), то в дальнейшем мы будем рассматривать случай, когда уравнение (1) заменой (2) можно привести к уравнению (4).

Из равенств (3) имеем

$$s(x)=\int_{x_0}^{x}\sqrt{\frac{r(t)}{k(t)}}\,dt,\quad a<x_0<b,\quad \varphi(x)=[k(x)\,r(x)]^{-1/4}.$$

Пусть $s(a)=c$ $(c<0)$, $s(b)=d$ $(d>0)$. Функция $s(x)$ непрерывна и монотонно возрастает на (a, b). Поэтому существует обратная функция $x=x(s)$, которая также будет монотонно возрастающей непрерывной функцией на (c, d). Функция $q(s)$ будет непрерывной функцией на (c, d).

2°. Естественно ожидать, что при $\lambda\to+\infty$ решения уравнения (4) будут в пределе совпадать с решениями уравнения $u''+\lambda u=0$, т. е. при $\lambda\to+\infty$ будет выполняться приближенное равенство

$$u(s) \approx A \cos \mu s + B \sin \mu s,$$

где $\mu = \sqrt{\lambda}$, A, B — постоянные.

Для доказательства этого утверждения воспользуемся методом, предложенным В. А. Стекловым *). Будем решать уравнение

$$u'' + \mu^2 u = q(s) u \tag{4a}$$

методом вариации постоянных, рассматривая правую часть как известную функцию. В результате получим

$$u(s) = \bar{u}(s) + R_\mu(s), \tag{7}$$

где

$$\bar{u}(s) = A \cos \mu s + B \sin \mu s,$$

$$R_\mu(s) = \frac{1}{\mu} \int_0^s \sin \mu (s - s') q(s') u(s') \, ds'.$$

Покажем, что при $c < c_1 \leqslant s \leqslant d_1 < d$ ($c_1 < 0$, $d_1 > 0$) величиной $R_\mu(s)$ в (7) при $\mu \to \infty$ можно пренебречь, т. е.

$$\lim_{\mu \to \infty} R_\mu(s) / \overline{M}(\mu) = 0, \tag{8}$$

где $\overline{M}(\mu) = \max\limits_{c_1 \leqslant s \leqslant d_1} |\bar{u}(s)|$.

Из выражения для $R_\mu(s)$ видно, что

$$|R_\mu(s)| \leqslant \frac{1}{\mu} LM(\mu), \tag{9}$$

где

$$L = \int_{c_1}^{d_1} |q(s')| \, ds', \quad M(\mu) = \max_{c_1 \leqslant s \leqslant d_1} |u(s)|.$$

Оценим величину $M(\mu)$ при $\mu \to \infty$. Из (7), (9) имеем

$$|u(s)| \leqslant \overline{M}(\mu) + \frac{1}{\mu} LM(\mu),$$

откуда

$$M(\mu) \leqslant \overline{M}(\mu) + \frac{1}{\mu} LM(\mu).$$

Разрешая это неравенство относительно $M(\mu)$, с помощью оценки (9) при $\mu > L$ получим

$$\frac{R_\mu(s)}{\overline{M}(\mu)} \leqslant \frac{L}{\mu - L},$$

что и доказывает справедливость равенства (8).

---

*) См. Стеклов В. А. Об асимптотическом поведении решений линейных дифференциальных уравнений.— Харьков: Изд-во ХГУ, 1956.

Возвращаясь к старым переменным, получим, что в случае, когда $k(x) > 0$, $r(x) > 0$ на (a, b), решения уравнения (1) при $\lambda \to +\infty$ на любом отрезке $[a_1, b_1] \subset (a, b)$ можно представить в виде

$$y(x) \approx \frac{1}{\sqrt{k(x)\,p(x)}}\,[A\cos\xi(x) + B\sin\xi(x)], \tag{10}$$

где

$$p(x) = \sqrt{\lambda\frac{r(x)}{k(x)}}, \quad \xi(x) = \int_{x_0}^{x} p(t)\,dt.$$

Замена решения уравнения (1) приближенным решением (10) носит название *квазиклассического метода* решения уравнения (1).

В случае, когда $k(x) > 0$, $r(x) < 0$, аналогичным образом получим

$$y(x) \approx \frac{1}{\sqrt{k(x)\,p(x)}}\left[Ae^{\xi(x)} + Be^{-\xi(x)}\right], \tag{10a}$$

где

$$p(x) = \sqrt{\lambda\left|\frac{r(x)}{k(x)}\right|}, \quad \xi(x) = \int_{x_0}^{x} p(t)\,dt.$$

При замене точного решения приближенным для нас важно было лишь выполнение неравенства $|q(s)| \ll \mu$ в уравнении (4). Поэтому приближенными решениями (10), (10a) можно пользоваться не только в тех случаях, когда велико значение λ, но и при $\lambda \sim 1$, если $|q(s)| \ll 1$. Как видно из формулы (5), это имеет место, когда производные функций $k(x)$, $r(x)$ малы, т. е. при медленном, плавном изменении коэффициентов уравнения (1).

3°. Практический интерес представляет также получение приближенного решения уравнения (1) при $\lambda \to +\infty$, справедливого вплоть до концов интервала (a, b). Рассмотрим, например, вопрос о приближенном представлении решения уравнения (1) при $a \leqslant x < b$. Если $k(a) > 0$, $r(a) > 0$, то все рассуждения, приводящие к (10), остаются в силе. Поэтому рассмотрим случай, когда хотя бы одна из функций $k(x)$ или $r(x)$ равна нулю при $x = a$.

Пусть, например,

$$k(x) = (x-a)^m k_1(x), \quad r(x) = (x-a)^l r_1(x),$$

где $k_1(a) > 0$, $r_1(a) > 0$ и функции $k_1(x)$, $r_1(x)$ имеют непрерывные вторые производные при $a \leqslant x < b$. Для того чтобы величина $s(a)$ была конечной, будем предполагать, что $(l-m)/2 > -1$. Перепишем выражения для $s(x)$, $q(s)$ при $x_0 = a$:

$$s(x) = \int_a^x \sqrt{\frac{r_1(t)}{k_1(t)}}\,(t-a)^{(l-m)/2}\,dt, \tag{11}$$

$$q(s)=(x-a)^{m-l-2}\frac{k_1(x)}{4r_1(x)}\left\{\frac{(l+m)(3m-l-4)}{4}+\right.$$
$$+\frac{x-a}{2}\left[(3m+l)\frac{k_1'}{k_1}+(m-l)\frac{r_1'}{r_1}\right]+$$
$$\left.+(x-a)^2\left[\left(\frac{k_1'}{k_1}+\frac{r_1'}{r_1}\right)'+\left(\frac{3}{4}\frac{k_1'}{k_1}-\frac{1}{4}\frac{r_1'}{r_1}\right)\left(\frac{k_1'}{k_1}+\frac{r_1'}{r_1}\right)\right]\right\}. \quad (12)$$

Если $x\approx a$, то

$$s(x)\approx\sqrt{\frac{r_1(a)}{k_1(a)}}\frac{(x-a)^{(l-m+2)/2}}{(l-m+2)/2},$$

и, следовательно, выражение для $q(s)$ можно представить в виде

$$q(s)=\frac{\nu^2-1/4}{s^2}+s^{\gamma-2}f(s),$$

где

$$\gamma=\frac{2}{l-m+2}>0,\quad \nu=\frac{|m-1|}{l-m+2},$$

а функция $f(s)$ непрерывна при $0\leqslant s<s(b)$. Мы видим, что в данном случае функция $q(s)$ имеет особенность при $s=0$. Поэтому для применения метода Стеклова удобно выделить главную особенность функции $q(s)$, т. е. переписать уравнение (4) в виде

$$u''+\left(\mu^2-\frac{\nu^2-1/4}{s^2}\right)u=s^{\gamma-2}f(s)u,\ \ \mu=\sqrt{\lambda}, \quad (13)$$

и решать это уравнение методом вариации постоянных, рассматривая правую часть уравнения (13) как известную функцию. Так как

$$u''+\left(\mu^2-\frac{\nu^2-1/4}{s^2}\right)u=0$$

является уравнением Ломмеля (14.4) и имеет решение

$$u=Av_\nu(\mu s)+Bv_{-\nu}(\mu s),$$

где $v_\nu(z)=\sqrt{z}\,J_\nu(z)$, A, B — постоянные, то в результате получаем решение уравнения (13) в виде

$$u(s)=Av_\nu(\mu s)+Bv_{-\nu}(\mu s)+R_\mu(s), \quad (14)$$

где

$$R_\mu(s)=\int_{s_0}^{s}K_\mu(s,s')(s')^{\gamma-2}f(s')u(s')\,ds',$$

$$K_\mu(s,s')=\frac{\pi}{2\mu\sin\pi\nu}\left[v_\nu(\mu s)v_{-\nu}(\mu s')-v_\nu(\mu s')v_{-\nu}(\mu s)\right].$$

Можно показать, что величиной $R_\mu(s)$ в (14) можно пренебречь при $\mu \to +\infty$. При оценке величины $R_\mu(s)$ удобно выбрать $s_0 > 0$ при $B \neq 0$ и $s_0 = 0$ при $B = 0$. Оценки величины $R_\mu(s)$ производятся по тому же плану, что и ранее, но технически они несколько сложнее, поскольку при оценке функций $v_{\pm\nu}(\mu s)$, которые в данном случае возникают вместо $\cos\mu s$ и $\sin\mu s$, приходится в отдельности рассматривать малые и большие значения величины μs:

$$|v_{\pm\nu}(\mu s)| \leqslant \begin{cases} C(\mu s)^{\pm\nu+1/2}, & \mu s \leqslant 1, \\ C, & \mu s > 1, \end{cases}$$

где C — постоянная.

Таким образом, возвращаясь к старым переменным, получим, что в случае, когда в уравнении (1) $k(x) = (x-a)^m k_1(x)$, $r(x) = (x-a)^l r_1(x)$, $l - m + 2 > 0$, а функции $k_1(x)$, $r_1(x)$ принимают положительные значения и имеют непрерывные вторые производные при $a \leqslant x < b$, решения уравнения (1) при $\lambda \to +\infty$, $a \leqslant x \leqslant b_1 < b$ можно приближенно представить в виде

$$y(x) \approx \sqrt{\frac{\xi(x)}{k(x)\,p(x)}}\{AJ_\nu[\xi(x)] + BJ_{-\nu}[\xi(x)]\}, \tag{15}$$

$$p(x) = \sqrt{\lambda\frac{r(x)}{k(x)}}, \quad \xi(x) = \int_a^x p(t)\,dt, \quad \nu \neq 0, 1, \ldots$$

При целых ν в (15) следует заменить $J_{-\nu}(\xi)$ на $Y_\nu(\xi)$. Заметим, что при $\xi(x) \gg 1$ замена функций Бесселя в (15) первым членом их асимптотического представления приводит к формуле, эквивалентной (10).

Если $k(x) > 0$, $r(x) < 0$, то (15) следует заменить на

$$y(x) \approx \sqrt{\frac{\xi(x)}{k(x)\,p(x)}}\{AI_\nu[\xi(x)] + BK_\nu[\xi(x)]\}, \tag{16}$$

$$p(x) = \sqrt{\lambda\left|\frac{r(x)}{k(x)}\right|}, \quad \xi(x) = \int_a^x p(t)\,dt.$$

Аналогичные формулы получаются для области $a < a_1 \leqslant x \leqslant b$, если функции $k(x)$, $r(x)$ имеют вид

$$k(x) = (b-x)^m k_1(x), \quad r(x) = (b-x)^l r_1(x),$$
$$k_1(x) > 0, \quad r_1(x) > 0.$$

Мы изложили метод асимптотического представления решений уравнения (1) при $\lambda \to +\infty$. Перейдем к получению такого представления для интересующих нас случаев.

2. Асимптотические представления для классических ортогональных полиномов при больших значениях n. Получим приближенное выражение для полиномов Якоби $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ при достаточно больших значениях n для $\alpha \geqslant 0$, $\beta \geqslant 0$, $x \in [-1, 1)$. Функция $y(x)=P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению (1) при

$$k(x)=(1-x)^{\alpha+1}(1+x)^{\beta+1},\quad r(x)=(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta},$$
$$\lambda=n(n+\alpha+\beta+1).$$

В данном случае $m=\beta+1$, $l=\beta$, $\nu=\beta$. Если $n\to\infty$, то $\lambda\to+\infty$. При $-1\leqslant x\leqslant 1-\delta$ имеем

$$y(x)\approx\frac{\sqrt{\xi}}{(1-x)^{\alpha/2+1/4}(1+x)^{\beta/2+1/4}}\left[AJ_\beta(\xi)+BJ_{-\beta}(\xi)\right],$$

где

$$\xi=\xi(x)=\mu\int_{-1}^{x}\frac{dt}{\sqrt{1-t^2}}=\mu\arccos(-x),\qquad \mu=\sqrt{\lambda}.$$

Так как существует предел

$$\lim_{x\to-1}y(x)=P_n^{(\alpha,\beta)}(-1)=(-1)^n\frac{\Gamma(n+\beta+1)}{\Gamma(\beta+1)\,n!},$$

то

$$B=0,\quad A=\lim_{x\to-1}\frac{(1-x)^{\alpha/2+1/4}(1+x)^{\beta/2+1/4}y(x)}{\sqrt{\xi}\,J_\beta(\xi)}=$$
$$=2^{\alpha/2+1/4}P_n^{(\alpha,\beta)}(-1)\,2^\beta\Gamma(\beta+1)\lim_{x\to-1}\left(\frac{\sqrt{1+x}}{\xi}\right)^{\beta+1/2}.$$

По правилу Лопиталя

$$\lim_{x\to-1}\frac{\sqrt{1+x}}{\xi(x)}=\lim_{x\to-1}\frac{1}{2\sqrt{1+x}\,\xi'(x)}=\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

Поэтому

$$A=(-1)^n\frac{2^{(\alpha+\beta)/2}\Gamma(n+\beta+1)}{n!\,\mu^{\beta+1/2}},\quad \mu=\sqrt{n(n+\alpha+\beta+1)}.$$

Полагая $x=-\cos\theta$, при $0\leqslant\theta\leqslant\pi-\delta$ получим

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(-\cos\theta)\approx\frac{(-1)^n\Gamma(n+\beta+1)\sqrt{\theta/2}}{n!\,\mu^\beta(\cos(\theta/2))^{\alpha+1/2}(\sin(\theta/2))^{\beta+1/2}}J_\beta(\mu\theta).\quad(17)$$

Приближенное выражение для полиномов Якоби $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ в области $-1<x\leqslant 1$ легко получить из (17), если воспользоваться соотношением

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=(-1)^nP_n^{(\beta,\alpha)}(-x).$$

Если $x\in[-1+\delta,\ 1-\delta]$, то приближенное выражение для $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ можно упростить, если использовать асимптотическое представление функции $J_\beta(\mu\theta)$ при $\mu\theta\to+\infty$ и асимптотическое представление функции $\Gamma(z)$ при $z\to\infty$ (см. Дополнение А):

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(\cos\theta)\approx\frac{\cos\{[n+(\alpha+\beta+1)/2]\,\theta-(2\alpha+1)\,\pi/4\}}{\sqrt{\pi n}\,(\sin(\theta/2))^{\alpha+1/2}\,(\cos(\theta/2))^{\beta+1/2}},\qquad(18)$$

$$0<\delta\leqslant\theta\leqslant\pi-\delta.$$

Отсюда при $\alpha=\beta=0$ получаем асимптотическое представление для полиномов Лежандра

$$P_n(\cos\theta)\approx\sqrt{\frac{2}{\pi n}}\,\frac{\cos((n+1/2)\,\theta-\pi/4)}{\sqrt{\sin\theta}}.$$

Аналогичным образом можно получить приближенное выражение для полиномов Лагерра $L_n^\alpha(x)$ при $x>0$ и достаточно больших n. В частности, при $0<\delta\leqslant x\leqslant N<\infty$ имеем

$$L_n^\alpha(x)\approx\frac{1}{\sqrt{\pi}}\,e^{x/2}x^{-\alpha/2-1/4}n^{\alpha/2-1/4}\cos\left(2\sqrt{nx}-(2\alpha+1)\frac{\pi}{4}\right).\qquad(19)$$

Если $\alpha=\pm1/2$, то представление (19) справедливо вплоть до $x=0$, так как в этом случае $\nu=\pm1/2$ и уравнение (13) не содержит особенности при $s=0$.

Соответствующие формулы для полиномов Эрмита $H_n(x)$ могут быть получены из (19) с помощью формул (6.14), (6.15), выражающих полиномы Эрмита через полиномы Лагерра:

$$H_n(x)\approx\sqrt{2}\left(\frac{2n}{e}\right)^{n/2}e^{x^2/2}\cos\left(\sqrt{2n}\,x-\frac{\pi n}{2}\right),\qquad|x|\leqslant N<\infty.\qquad(20)$$

Замечания. 1. Оценки (7.13а), (7.20а), (7.21а), полученные в гл. II с помощью достаточно громоздких вычислений, легко вывести из оценок (18)—(20).

2. Асимптотическое представление (18) было выведено при $\alpha\geqslant0$, $\beta\geqslant0$. Однако оно остается справедливым при любых вещественных значениях α, β. Проведем доказательство по индукции, предполагая, что формула (18) справедлива для полиномов $P_n^{(\alpha+1,\beta+1)}(\cos\theta)$, $P_n^{(\alpha+2,\beta+2)}(\cos\theta)$. Воспользуемся дифференциальным уравнением для полиномов Якоби и формулой дифференцирования (5.6). В результате получим

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)=-\frac{1}{\lambda_n}\left[\tau(x)\frac{n+\alpha+\beta+1}{2}P_{n-1}^{(\alpha+1,\beta+1)}(x)+\right.$$
$$\left.+\sigma(x)\frac{(n+\alpha+\beta+1)(n+\alpha+\beta+2)}{4}P_{n-2}^{(\alpha+2,\beta+2)}(x)\right],$$

где

$$\lambda_n=n(n+\alpha+\beta+1),\quad\tau(x)=\beta-\alpha-(\alpha+\beta+2)\,x,$$
$$\sigma(x)=1-x^2$$

Отсюда

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(\cos\theta)=-\left[\frac{\beta-\alpha-(\alpha+\beta+2)\cos\theta}{2n}P_{n-1}^{(\alpha+1,\beta+1)}(\cos\theta)+\right.$$
$$\left.+\frac{\sin^2\theta}{4}\left(1+\frac{\alpha+\beta+2}{n}\right)P_{n-2}^{(\alpha+2,\beta+2)}(\cos\theta)\right].$$

Подставляя в правую часть асимптотические представления для $P_{n-1}^{(\alpha+1,\beta+1)}(\cos\theta), P_{n-2}^{(\alpha+2,\beta+2)}(\cos\theta)$, полученные по формуле (18), и сохраняя главные члены, получим

$$P_n^{(\alpha,\beta)}(\cos\theta) \approx -\frac{\sin^2\theta}{4} P_{n-2}^{(\alpha+2,\beta+2)}(\cos\theta) \approx$$

$$\approx -\frac{\sin^2\theta}{4} \cdot \frac{\cos\{[n-2+(\alpha+\beta+5)/2]\theta-(2\alpha+5)(\pi/4)\}}{\sqrt{\pi n}\,(\sin(\theta/2))^{\alpha+5/2}(\cos(\theta/2))^{\beta+5/2}} =$$

$$= \frac{\cos\{[n+(\alpha+\beta+1)/2]\theta-(2\alpha+1)(\pi/4)\}}{\sqrt{\pi n}\,(\sin(\theta/2))^{\alpha+1/2}(\cos(\theta/2))^{\beta+1/2}},$$

что совпадает с (18). Аналогично обосновывается справедливость формулы (19) при любых вещественных значениях α.

3. Квазиклассическое приближение для уравнений с особенностью. Квазиклассика для центрально-симметричного поля. При рассмотрении движения частицы в центрально-симметричном поле представляет интерес получение квазиклассического приближения для уравнения вида

$$u'' + r(x)u = 0, \tag{21}$$

где функция $x^2 r(x)$ непрерывна вместе со своими производными первого и второго порядка при $0 \leqslant x \leqslant b$. Полученное ранее приближение оказывается неприменимым для уравнения (21) в окрестности точки $x=0$. Однако заменой переменных $x=e^z$, $u=e^{z/2}v(z)$ это уравнение приводится к виду

$$v''(z) + r_1(z)v = 0, \tag{22}$$

где

$$r_1(z) = -1/4 + x^2 r(x)\,|_{x=e^z}.$$

Функция $r_1(z)$ при $z\to-\infty$ (что соответствует $x\to 0$) мало отличается от постоянной, равной $-1/4+\lim\limits_{x\to 0} x^2 r(x)$. Кроме того, $\lim\limits_{z\to-\infty} r_1^{(k)}(z)=0$ $(k=1, 2, \ldots)$. Поэтому при достаточно больших по модулю отрицательных значениях z функция $r_1(z)$ и ее производные будут медленно меняться и для уравнения (22) будет применимо квазиклассическое приближение. Если условие применимости квазиклассического приближения для (22) выполнено при всех требуемых значениях z, то, возвращаясь к старым переменным, получим приближенное решение уравнения (21) в прежнем виде, но с заменой функции $r(x)$ на $r(x)-1/(4x^2)$.

Так, например, при решении в сферических координатах уравнения Шредингера

$$-\frac{1}{2}R'' + \left[U(r) + \frac{l(l+1)}{2r^2}\right]R = ER$$

для радиальной части волновой функции $R(r)$, где r — расстояние от начала координат, $U(r)$ — потенциальная энергия, E — полная энергия частицы, $l=0, 1, \ldots$ — орбитальное квантовое число, в квазиклассическом приближении получаем выражение

$$R(r) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{\xi}{p}}\,[AJ_{1/3}(\xi) + BJ_{-1/3}(\xi)], & r \geqslant r_0, \\ \sqrt{\dfrac{\xi}{p}}\,[CI_{1/3}(\xi) + DK_{1/3}(\xi)], & r \leqslant r_0, \end{cases}$$

где

$$p = p(r) = \sqrt{\left| 2[E - U(r)] - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} \right|},$$

$$\xi = \xi(r) = \left| \int_{r_0}^{r} p(r')\,dr' \right|,$$

r_0 — корень уравнения $p(r) = 0$ (мы предполагаем, что этот корень простой).

Так как функция $R(r)$ должна быть ограниченной при $r \to 0$, т. е. $\xi \to \infty$, следует положить $C = 0$. Из условия сопряжения при $r = r_0$ функций $R(r)$ и $R'(r)$ постоянные A, B можно выразить через постоянную D. Разлагая подкоренное выражение в формуле для $p(r)$ по степеням $r - r_0$, нетрудно убедиться в том, что функции $p(r)/\sqrt{|r - r_0|}$, $\xi(r)/|r - r_0|^{3/2}$ и их первые производные непрерывны при $r = r_0$. Поэтому из условий сопряжения функций $R(r)$ и $R'(r)$ в точке $r = r_0$ вытекают аналогичные условия сопряжения функции

$$\Phi(r) = \left(\frac{\xi}{2}\right)^{1/3} \sqrt{\frac{p}{\xi}}\, R(r)$$

и ее производной. Имеем

$$\Phi(r) = \begin{cases} \dfrac{A(\xi/2)^{2/3}}{\Gamma(4/3)} + \dfrac{B}{\Gamma(2/3)} + O[(r - r_0)^3], & r \geqslant r_0, \\ \dfrac{D\pi}{2\sin(\pi/3)} \left[\dfrac{1}{\Gamma(2/3)} - \dfrac{(\xi/2)^{2/3}}{\Gamma(4/3)} \right] + O[(r - r_0)^3], & r \leqslant r_0. \end{cases}$$

Так как функция $\xi^{2/3}/|r - r_0|$ непрерывна при $r = r_0$, то сравнение коэффициентов при различных степенях $r - r_0$ дает

$$A = B = \frac{\pi}{\sqrt{3}} D.$$

4. Асимптотика цилиндрических функций при больших значениях порядка. Формулы Лангера. Изложенный выше метод можно использовать для нахождения асимптотики цилиндрических функций при больших значениях порядка ν. Для этого приведем уравнение Бесселя

$$x^2 y'' + xy' + (x^2 - \nu^2) y = 0$$

к виду (21) заменой $u(x) = \sqrt{x}\, y(\nu x)$ (см. (14.4)). Функция $u(x)$

удовлетворяет уравнению

$$u'' + r(x)u = 0, \quad r(x) = \nu^2 - \frac{\nu^2 - 1/4}{x^2}.$$

В данном случае можно воспользоваться соображениями, развитыми в предыдущем пункте, и положить $x = e^z$, $u = e^{z/2}v(z)$. Тогда придем к уравнению

$$v'' + r_1(z)v = 0, \quad r_1(z) = \nu^2(e^{2z} - 1). \tag{23}$$

Так как $\nu \to \infty$, то для уравнения (23) применимо квазиклассическое приближение. В старых переменных это приближение для функции $u(x)$ имеет вид

$$u(x) = \sqrt{\frac{\xi}{p}} \cdot \begin{cases} AI_{1/3}(\xi) + BK_{1/3}(\xi), & x \leqslant 1, \\ CH^{(1)}_{1/3}(\xi) + DH^{(2)}_{1/3}(\xi), & x \geqslant 1. \end{cases} \tag{24}$$

Здесь

$$p = p(x) = \nu s/x, \quad s = \sqrt{|1 - x^2|},$$

$$\xi = \xi(x) = \left| \int_1^x p(t)\,dt \right| = \begin{cases} \nu(\operatorname{arth} s - s), & x \leqslant 1, \\ \nu(s - \operatorname{arctg} s), & x \geqslant 1. \end{cases}$$

Положим, например, $u(x) = \sqrt{x}H^{(1)}_\nu(\nu x)$. Для определения коэффициентов C, D сравним главные члены асимптотики при $x \to \infty$ в левой и правой частях (24). Так как при $x \to \infty$ и фиксированном ν

$$s(x) = x + O(1/x), \quad \xi(x) = \nu(x - \pi/2) + O(1/x),$$

то

$$\sqrt{x}H^{(1)}_\nu(\nu x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi\nu}} \exp\left\{i\left(\nu x - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\right\} =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi\nu}} \left\{C \exp\left\{i\left(\nu\left(x - \frac{\pi}{2}\right) - \frac{\pi}{6} - \frac{\pi}{4}\right)\right\} + \right.$$

$$\left. + D \exp\left\{-i\left(\nu\left(x - \frac{\pi}{2}\right) - \frac{\pi}{6} - \frac{\pi}{4}\right)\right\}\right\},$$

откуда

$$D = 0, \quad C = e^{i\pi/6}.$$

Коэффициенты A, B определяются из условий сопряжения функций $u(x)$ и $u'(x)$ при $x = 1$ рассмотренным выше способом. В результате получим

$$A = -2i, \quad B = \frac{2}{\pi} e^{-i\pi/3},$$

т. е. в квазиклассическом приближении при больших значениях ν

$$H^{(1)}_\nu(\nu x) = \begin{cases} 2\sqrt{\dfrac{\operatorname{arth} s}{s} - 1}\left[-iI_{1/3}(\xi) + \dfrac{e^{-i\pi/3}}{\pi} K_{1/3}(\xi)\right], & x \leqslant 1, \\ \sqrt{1 - \dfrac{\operatorname{arctg} s}{s}}\, e^{i\pi/6} H^{(1)}_{1/3}(\xi), & x \geqslant 1. \end{cases} \tag{25}$$

Приравнивая действительные части в формуле (25), получим квазиклассическое приближение для функции Бесселя $J_\nu(\nu x)$ при больших значениях ν:

$$J_\nu(\nu x) = \begin{cases} \dfrac{1}{\pi}\sqrt{\dfrac{\operatorname{arth} s}{s} - 1}\, K_{1/3}(\xi), & x \leqslant 1, \\ \dfrac{1}{\sqrt{3}}\sqrt{1 - \dfrac{\operatorname{arctg} s}{s}}\,[J_{-1/3}(\xi) + J_{1/3}(\xi)], & x \geqslant 1. \end{cases} \tag{26}$$

Формулы (25), (26) называются *формулами Лангера*. Как показывают точные оценки, они дают равномерное приближение для цилиндрических функций с погрешностью $O(1/\nu^{4/3})$*). Интересно отметить, что формула (26) дает правильное поведение функции $J_\nu(\nu x)$ при $x \to 0$, несмотря на то, что она была получена с помощью асимптотических представлений для цилиндрических функций при $x \to \infty$.

5. Определение собственных значений энергии для уравнения Шредингера в квазиклассическом приближении. Формула Бора — Зоммерфельда. Решения уравнения Шредингера

$$-\frac{1}{2}\psi''(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x), \qquad -\infty < x < \infty, \tag{27}$$

описывающего движение частиц в поле с потенциальной энергией $U(x)$, могут быть найдены в явной форме лишь для некоторых частных видов $U(x)$ (E — полная энергия частицы; мы используем систему единиц, в которой масса частицы m и постоянная Планка $\hbar$ равны единице). Это возможно, например, когда (27) удается свести к обобщенному уравнению гипергеометрического типа (см. теорему в § 9, п. 2). В связи с этим имеют большое значение методы приближенного решения уравнения (27).

Решим задачу о нахождении собственных значений энергии для уравнения Шредингера (27) в квазиклассическом приближении. Требуется найти такие значения энергии E, для которых $E - U(x) < 0$ при $x \to \pm\infty$, а функция $\psi(x)$ удовлетворяет условию нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \tag{28}$$

Пусть

$$E - U(x) \geqslant 0, \qquad x_1 \leqslant x \leqslant x_2$$

(эту область называют *областью классического движения*), и пусть

$$E - U(x) < 0, \quad x < x_1, \quad x > x_2,$$

где x_1, x_2 — простые корни уравнения $E = U(x)$ (точки x_1, x_2 называют в квантовой механике *точками поворота*).

*) Langer R. E. On the asymptotic solutions of ordinary differential equations with an application to the Bessel functions of large order.— Trans. Amer. Math. Soc., 1931, 33, p. 23—64.

При решении поставленной задачи будем предполагать, что интегралы $\int\limits_{-\infty}^{x_1} p(x)\,dx, \int\limits_{x_2}^{\infty} p(x)dx$ расходятся $\left(p(x)=\sqrt{2\,|E-U(x)|}\right)$, а величина $\int\limits_{x_1}^{x_2} p(x)dx$ является достаточно большой. В квазиклассическом приближении при $-\infty < x \leqslant x_2$ имеем

$$\psi(x)=\begin{cases} \sqrt{\dfrac{\xi}{p}}[A_1 I_{1/3}(\xi)+B_1 K_{1/3}(\xi)], & x\leqslant x_1,\\ \sqrt{\dfrac{\xi}{p}}[A_2 J_{-1/3}(\xi)+B_2 J_{1/3}(\xi)], & x_1\leqslant x\leqslant x_2,\end{cases} \tag{29}$$

$$\xi=\left|\int\limits_{x_1}^{x} p(s)\,ds\right|.$$

Чтобы сходился интеграл $\int\limits_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2dx$, мы должны положить $A_1=0$. Постоянные A_2, B_2 можно выразить через B_1 с помощью условия сопряжения выражений для $\psi(x)$ и $\psi'(x)$ при $x=x_1$ (см. п. 3). Это дает $A_2=B_2=(\pi/\sqrt{3})B_1$. Таким образом, при $x_1\leqslant x\leqslant x_2$

$$\psi(x)=A_2\sqrt{\frac{\xi}{p}}[J_{-1/3}(\xi)+J_{1/3}(\xi)]. \tag{30}$$

Рассмотрим значения x, для которых величина $\xi(x)$ является достаточно большой. Для таких значений x можно воспользоваться асимптотическим представлением для $J_{\pm 1/3}(z)$:

$$J_{\pm 1/3}(z)\approx\sqrt{\frac{2}{\pi z}}\cos\left(z\mp\frac{\pi}{6}-\frac{\pi}{4}\right).$$

В результате получим

$$\psi(x)=\frac{c_1}{\sqrt{p(x)}}\cos\left(\int\limits_{x_1}^{x} p(s)\,ds-\frac{\pi}{4}\right), \tag{31}$$

где c_1 — постоянная.

Проводя подобные же рассуждения, мы можем получить выражение для функции $\psi(x)$ при $x_1 < x \leqslant x_2$, исходя из поведения этой функции при $x > x_2$. Если рассмотреть значения x, для которых величина $\int\limits_{x}^{x_2} p(s)\,ds$ достаточно велика, то в результате получим

$$\psi(x)=\frac{c_2}{\sqrt{p(x)}}\cos\left(\int\limits_{x}^{x_2} p(s)\,ds-\frac{\pi}{4}\right), \tag{32}$$

где c_2 — постоянная.

Рассмотрим значения x, для которых как $\int\limits_{x_1}^{x} p(s)\,ds$, так и $\int\limits_{x}^{x_2} p(s)\,ds$ велики. В этом случае для функции $\psi(x)$ мы имеем два выражения — (31) и (32). Эти выражения будут совпадать лишь в том случае, если выполнено условие

$$\int\limits_{x_1}^{x} p(s)\,ds + \int\limits_{x}^{x_2} p(s)\,ds = \int\limits_{x_1}^{x_2} p(s)\,ds = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{33}$$

где $n = 0, 1, \ldots$ Нетрудно видеть, что n является числом нулей функции $\psi(x)$ (эта функция может обращаться в нуль лишь при $x_1 < x < x_2$). При этом $c_2 = (-1)^n c_1$. Таким образом, в квазиклассическом приближении значения энергии дискретного спектра $E = E_n$ $(n = 0, 1, \ldots)$ должны выбираться из условия (33). Это условие в квантовой механике называют *условием Бора — Зоммерфельда.*

Можно получить условие Бора — Зоммерфельда и для частицы, движущейся в центрально-симметричном поле $U(r)$. Повторяя рассмотренные выше рассуждения и используя результаты п. 3, получим условие Бора — Зоммерфельда для определения значений энергии $E = E_{nl}$ дискретного спектра в следующем виде:

$$\int\limits_{r_1(E)}^{r_2(E)} p(r)\,dr = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right), \tag{34}$$

$$p(r) = \sqrt{2\left|E - U(r) - \frac{(l + 1/2)^2}{2r^2}\right|}, \quad p(r)\,|_{r=r_1, r_2} = 0.$$

Примеры. 1. Найдем в квазиклассическом приближении уровни энергии частицы, движущейся в поле $U(x) = (\mu\omega^2/2)x^2$ (линейный гармонический осциллятор). В § 9 для этой задачи было получено точное решение. Если воспользоваться той же системой единиц, что и в § 9, то уравнение Шредингера (27) можно записать в виде

$$-\frac{1}{2}\psi'' + \frac{x^2}{2}\psi = \varepsilon\psi, \quad E = \hbar\omega\varepsilon.$$

В данном случае $p(x) = \sqrt{2\varepsilon - x^2}$, $x_1 = -\sqrt{2\varepsilon}$, $x_2 = \sqrt{2\varepsilon}$. Уровни энергии получаем из условия Бора — Зоммерфельда

$$\int\limits_{-\sqrt{2\varepsilon}}^{\sqrt{2\varepsilon}} \sqrt{2\varepsilon - x^2}\,dx = \pi\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{35}$$

Как известно,

$$\int \sqrt{\alpha x^2+\beta}\,dx = \frac{x}{2}\sqrt{\alpha x^2+\beta} + \frac{\beta}{2}\int \frac{dx}{\sqrt{\alpha x^2+\beta}}.$$

Поэтому

$$\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2\varepsilon - x^2}\,dx = \varepsilon \int_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{\sqrt{2\varepsilon - x^2}} = \varepsilon \arcsin \frac{x}{\sqrt{2\varepsilon}}\Big|_{x_1}^{x_2} = \pi\varepsilon.$$

Из условия (35) находим $\varepsilon = \varepsilon_n = n + 1/2$, что совпадает с точным решением даже в тех случаях, когда не выполняется условие $\int_{x_1}^{x_2} p(x)\,dx \gg 1$.

2. Найдем в квазиклассическом приближении уровни энергии электрона в поле $U(r) = -Z/r$ (мы пользуемся атомными единицами). В данном случае в условии (34) следует положить $U(r) = -Z/r$. С помощью интегрирования по частям находим

$$\int_{r_1}^{r_2} p(r)\,dr = rp(r)\Big|_{r_1}^{r_2} - \int_{r_1}^{r_2} \frac{r\left(-Z/r^2 + (l+1/2)^2/r^3\right)}{\sqrt{2\left[E + Z/r - (l+1/2)^2/r^2\right]}}\,dr =$$

$$= Z\int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{\sqrt{2\left[Er^2 + Zr - (l+1/2)^2/2\right]}} +$$

$$+ \int_{x_1}^{x_2} \frac{(l+1/2)^2\,dx}{\sqrt{2\left[E + Zx - (l+1/2)^2\,x^2/2\right]}} = \pi\left(\frac{Z}{\sqrt{-2E}} - l - \frac{1}{2}\right),$$

$$x = \frac{1}{r}, \quad E < 0.$$

Подставляя найденное выражение для интеграла в (34), получаем

$$E = E_{nl} = -\frac{Z^2}{2\,(n+l+1)^2},$$

что совпадает с точным значением при любых значениях n, l.